

# МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСОРАЗМЕРНОЙ ФАЗЫ В 2D МОДЕЛИ С ЧАСТИЦАМИ КОНЕЧНЫХ РАЗМЕРОВ

**Бибихов Ю.В.**

*д. ф.-м. н., доц. Дмитриев С.В.*

Алтайский государственный технический университет, г. Барнаул

e-mail: genphys@mail.ru

В рамках двумерной модели кристалла с частицами конечных размеров моделируется несоразмерная фаза, возникающая под действием внешнего двухосного давления. Модель содержит два нелинейных члена, которые, в зависимости от соотношения параметров, допускают устойчивость 1q, 2q или 3q модулированных фаз [1].

Пусть векторы  $a=(1,0)$  и  $b=(-1/2, \sqrt{3}/2)$  генерируют гексагональную решетку с узлами  $ma+nb$ , где  $m, n$  - целые числа, см. рис. 1(a). Обратная решетка генерируется векторами  $a^*, b^*$  (показаны на рис. 1(b) вместе с первой зоной Бриллюэна). Динамика рассматриваемой модели описывается уравнением

$$\begin{aligned} \ddot{u}_{m,n} + (3P_x - P_y - 48F)(u_{m+1,n} + u_{m-1,n}) + \\ + 2(P_y - 24F)(u_{m+1,n+1} + u_{m,n+1} + u_{m-1,n-1} + u_{m,n-1}) + \\ + 16F(u_{m+2,n+1} + u_{m+1,n+2} + u_{m-1,n+1} + u_{m-2,n-1} + u_{m-1,n-2} + u_{m+1,n-1}) + \\ + (1 - 6P_x - 6P_y + 192F)u_{m,n} + Hu_{m,n}^2 + u_{m,n}^3 = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где мы ограничились случаем изотропной среды,  $F_x = F_y = F$ .

Возможны различные физические интерпретации модели (1). Напомним, что многие диэлектрические кристаллы состоят из атомов, собранных в очень жесткие, почти недеформируемые группы. Таков, например, кристалл кварца, состоящий из кластеров  $\text{SiO}_4$ , имеющих форму тетраэдров. Тетраэдры соединены в вершинах общими атомами кислорода, играющими роль шарниров. Фазовый переход в кварце происходит за счет взаимного поворота шарнирно-соединенных тетраэдров, при этом деформация тетраэдров пренебрежимо мала. Кварц обладает гексагональной симметрией, и в несоразмерной фазе кварца модуляция распространяется в плоскости  $(x, y)$ , так, что ее можно рассматривать в рамках двумерной модели. Эти соображения привели нас к рассмотрению двумерного слоя абсолютно жестких треугольных частиц (молекул), соединенных упругими шарнирами, см. рис. 1 (c). Если угол между осями двух соседних молекул отличен от нуля, то в упругом шарнире возникает момент сил, стремящийся уменьшить абсолютное значение этого угла. Жесткость шарнира обозначена через  $F$ . Каждый шарнир имеет одну степень свободы – перемещение перпендикулярное плоскости  $(x, y)$ . Шарниры испытывают действие потенциала содержащего ангармонические члены третьего и четвертого порядков. Потенциал призван описать влияние остальной части кристалла на рассматриваемый слой молекул. Модель подвержена

внешнему давлению с компонентами  $P_x$ ,  $P_y$ , действующему вдоль плоскости  $(x, y)$ .

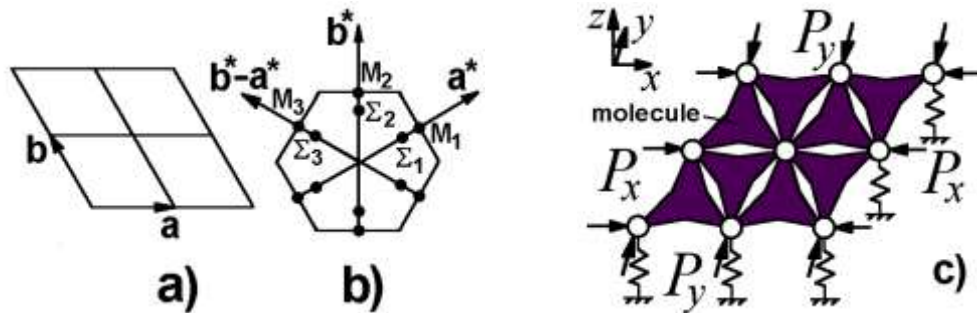


Рис. 2. (а) гексагональная решетка, (б) обратная решетка и первая зона Бриллюэна, (с) двумерная модель с частицами конечных размеров. Жесткие молекулы соединены друг с другом посредством упругих шарниров и находятся во внешнем потенциале. Модель подвержена действию внешнего давления с компонентами  $P_x$ ,  $P_y$ .

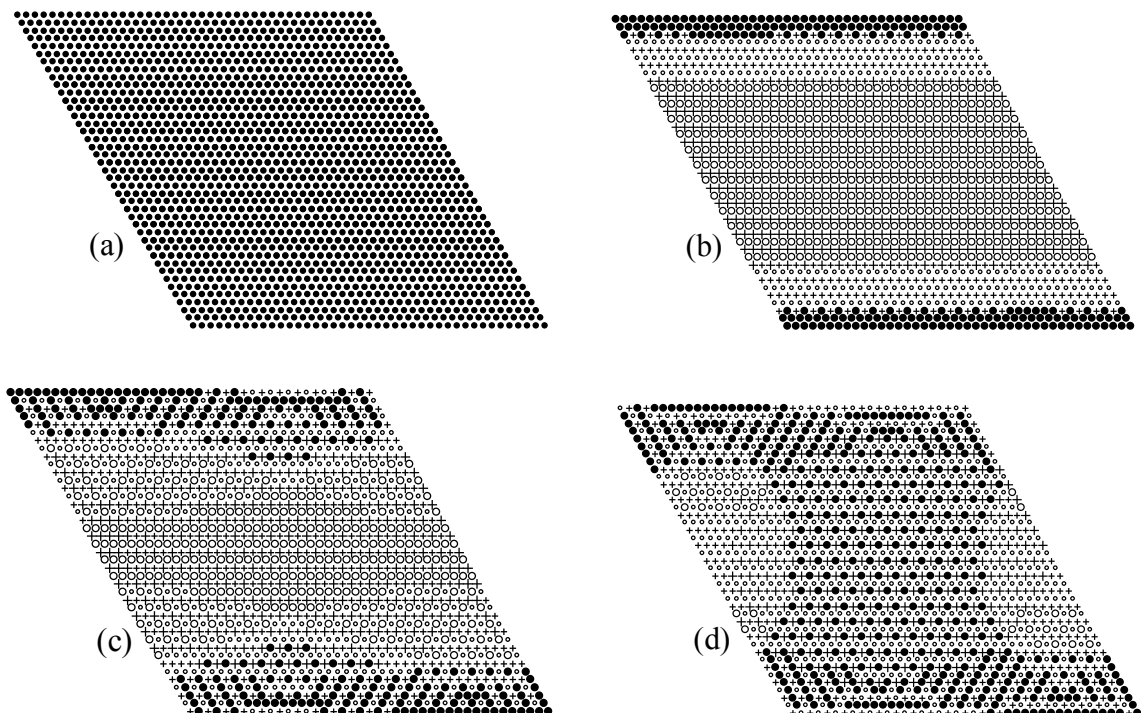


Рис. 3. Цепочка фазовых превращений, наблюдаемая в модели (1) при уменьшении  $F$ : (а) нормальная фаза (тривиальное решение), (б) "переохлажденная"  $1q$  несоразмерная фаза с  $\kappa = 20/41$ , (с,д) промежуточные этапы релаксации в  $3q$  фазу.

Для изучения  $1q \rightarrow 3q$  перехода предположим наличие малого отклонения от условия  $P_x = P_y = P$ , а именно, положим  $P_x = P$ ,  $P_y = P + \varepsilon$ , где  $\varepsilon$  мало по сравнению с  $P$  и, для определенности, положительно. Физически,  $\varepsilon$  есть малое одноосное давление, приложенное вместе с гидростатическим давлением  $P$ .

Наличие малого одноосного давления понижает симметрию дисперсионной поверхности и, в соответствии с условием  $F > P_y/8$ , ее обращение в нуль произойдет в точке  $\Sigma_2$  с появлением 1q несоразмерной фазы. Дальнейшее уменьшение  $F$  приводит к обращению в нуль частот в точках  $\Sigma_1, \Sigma_3$ , и происходит переход в 3q несоразмерную фазу. Фазовые превращения, наблюдаемые в ЕНМ модели при уменьшении  $F$  вдоль линии  $P = \text{const} = P(\kappa)$ , а также кинетика 1q → 3q перехода показаны на Рис. 2 при  $H = -0.01$ ,  $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-5}$ . К уравнению движения (1) был добавлен диссипативный член для того чтобы найти равновесные состояния модели при различных значениях внешних параметров. Интервал  $[-u_{\max}, u_{\max}]$ , где  $u_{\max}$  есть максимальное абсолютное значение перемещения узлов, был разделен на 5 равных интервалов и перемещения узлов обозначены одним из значков: большой белый кружок, маленький белый кружок, черный кружок, маленький крестик, большой крестик, в зависимости от интервала в который попадает перемещение данного узла. На Рис. 2 (а) показана нормальная фаза (тривиальное решение). На Рис. 2 (b) показан один период "переохлажденной" 1q фазы. Параметр  $F$  был мгновенно изменен до значения  $F = F(20/41) - 10^{-4}$ , так, что 1q фаза стала неустойчивой, и начался 1q → 3q переход. На Рис. 2 (c,d) показаны переходные стадии процесса. При дальнейшем уменьшении параметра  $F$  происходит переход 3q несоразмерной фазы в соразмерную низкосимметричную 3q фазу с  $\kappa = 1/2$ .

Таким образом, изучена несоразмерная фаза, возникающая в модели с частицами конечных размеров под действием внешнего давления. Численно изучен переход между 1q и 3q фазами, характерный для кристаллов с гексагональной симметрией. Полученная цепочка фазовых превращений качественно идентична той, что наблюдается в кварце. Проведенные модельные расчеты объясняют экспериментально установленный факт увеличения температурного интервала существования 1q фазы в кварце при наличии одноосного растяжения [2].

### Список литературы

1. Incommensurate Phases in Dielectrics: Part 1, Fundamentals, Eds. R. Blinc and A.P. Levanyuk, V.14.1, Amsterdam: North-Holland, 1986. – 417 p.
2. Shigenari T., Dmitriev S.V., Abe K., Makita Y., Yajima M., Aslanyan T. A new interpretation of incommensurate phase of quartz // Ferroelectrics. – 2000. – V.240. – P. 147-154.